

ZÁRÓJELENTÉS

Relativisztikus hatások elméleti vizsgálata bulk anyagok és nanostruktúrák mágneses tulajdonságaiban

Témavezető: Dr. Udvardi László
2002 – 2006

1 Kutatási terv

Kutatásainkat elsősorban a mágneses vékonyrétegeknek és nanoszerkezeteknek a nagysűrűségű adattárolásban való alkalmazhatósága valamint az alkalmazások alapjait jelentő fizikai jelenségek megértése motiválta. A relativisztikus hatások, közöttük is elsősorban a spin-pálya kölcsönhatás, számos jelenségben meghatározóak, mint pl. a mágneses anizotrópia, különböző reorientációs fázis átalakulások vagy a domén-falak képződése, amelyek fontosak pl. a merőleges mágneses adattároló anyagok (*PMRM, perpendicular magnetic recording media*) tervezésében is. A jelen pályázat szerves folytatása az OTKA 2002-ben lezárult T030240 nyilvántartási számú projektjének, amelynek Dr. Szunyogh László volt a témavezetője. Az e projekt keretein belül alkalmazott eljárásokat használtuk fel kutatásaink során illetve fejlesztettük tovább. A szerződésben a következő főbb kutatási program pontokat adtuk meg:

1. Mágneses vékonyrétegek – Co/Cu(100), Fe/Cu(100) – magnon spektrumának és mágneses anizotrópiájának meghatározása különböző rétegvastagság esetén. Ugyanezen rendszerek Curie hőmérsékletének vizsgálata a rétegszám függvényében a spin-hullám közelítés segítségével. A témakörben 7 publikáció született: [4,3,9,20,22,23,26]
2. Réteges szerkezetű ferromágneses anyagokban – CoPt, CoPt₃ – mágneses domén-falak vastagságának first principles meghatározása. Megvizsgáljuk a doménfal szerkezetének eltéréseit a fenomenologikus modell által jósolt szerkezettől. Transzport tulajdonságok meghatározása a doménfalon kersztül. A témakörben 7 publikáció született: [2,1,10,8,11,7,16].

3. Felületi hordozóra helyezett szennyezők, atomcsoportok elektron- és mágneses szerkezetének vizsgálata az általunk kifejlesztett SKKR program segítségével. Felületi szennyezések ill. klaszterek közötti kölcsönhatás vizsgálata. A témakörben 8 publikáció született: [5,6,18,14,15,19,13,24]

A felsorolt témakörökön kívül születtek eredmények a magnetooptikai Kerr effektus ab initio leírása terén [17]. Szorosan együttműködve a bécsi Center for Computational Material Science csoportjával komoly lépéseket tettünk egy *full potential* SKKR kód kifejlesztésében [25] is.

2 Az eredmények részletes ismertetése

1. A mágneses rendszerek elemi gerjesztéseit, a spinhullámokat legtöbbször egy klasszikus Heisenberg modell segítségével írjuk le. A relativisztikus hatások, a spinpálya csatolás következményeként a kicserélődési csatolás anizotrópiájaként és egy a rendszer szimmetriájától függő "on-site" anizotrópia tag megjelenésében jelentkeznek. Ezek a hatások csekély mértékben módosítják a gerjesztési spektrumot, de kétdimenziós rendszerekben nélkülük nem alakulhatna ki hosszútávú mágneses rend, ezért szerepük ezekben az anyagokban felértékelődik. A projekt során kidolgoztuk az u.n. infinitezimális elforgatások módszerének relativisztikus változatát. Az eljárás segítségével meghatároztuk Fe és Co monorétegek magnon spektrumát [9,20]. Reprodukáltuk a mágneses anizotrópia következtében fellépő gap-et. A hordozó síkjában fekvő mágnesezettség esetén megmutattuk, hogy az inverziós szimmetria sérülése miatt a spinek között fellép a Dzyaloshinsky-Moriya kölcsönhatás, amely a magnon spektrum aszimmetriáját okozza. Réz hordozóra növesztett monoatomos kobalt réteg esetén kimutattuk a magnonok elliptikus polarizáltságát. A módszer a gerjesztési spektrum számolásán túl lehetővé teszi az on-site anizotrópia és az anizotróp kicserélődési csatolási állandók meghatározását. A paraméterek segítségével tanulmányoztuk a MnAu₂ rendezett ötvözetben kialakuló spin hélixet [26]. Megvizsgáltuk, hogy a Mn atomok néhány százalékos helyettesítése Fe, Co és Cr atomokkal hogyan befolyásolja a helikális mágneses szerkezet kialakulását.

Az úgynevezett Disordered Local Moment közelítésben tanulmányoztuk egy réz szubsztrátra helyezett vas vékonyréteg Curie hőmérsékletének változását a vékonyréteg feletti réz fedőréteg vastagsága függvényében [4]. A vonatkozó kísérleti adatok ezen rétegvastagság változtatásával oszcilláló Curie hőmérsékletet mutattak ki,

melyet számításainkkal kiválóan reprodukálni tudtunk és a mágneses vékonyréteg spin-spin korrelációs függvényének az elektronszerkezettel összefüggő változásával magyaráztunk. Ugyancsak réz szubsztráton növesztett kobalt vékonyréteg mágneses anizotrópiáját (MA) vizsgáltuk a felületi rácsrelaxáció figyelembe vételével [3]. A kísérleti eredményekkel megegyezően azt kaptuk, hogy ebben a rendszerben az MA energia viszonylag érzéketlen a relaxáció mértékére és a domináns dipól–dipól kölcsönhatás miatt a mágnesezettség a kobalt réteg vastagságától függetlenül a felülettel párhuzamos irányú.

Megvizsgáltuk $\text{Cu}_3\text{Au}(001)$ szubsztráton növesztett vékony, fcc szerkezetű vas filmek mágneses átfordulási fázisátmenetét. Az idevonatkozó kísérletek azt mutatták, hogy alacsony hőmérsékleten kb. 3 atomi réteg vastagságnál a vas film felületre merőleges mágnesezettsége a felülettel párhuzamos irányba fordul. A mágneses anizotópia energia (MAE) számításánál figyelembe vettük az arany atomok diffúzióját a vas filmbe ill. a vas atomi rétegek geometriai relaxációjának hatását is tanulmányoztuk. A két atomi réteg vastagságú film csak abban az esetben mutat merőleges mágnesezettséget, ha a rétegek "egymástól távolodnak" (merőleges expansió) és az arany atomok diffúziója kicsi. Három vas monoréteg esetében éppen az arany atomok diffúziója, melyet egy merőleges kontrakció stabilizál, vezet merőleges mágnesezettséghez. Ezek alapján arra következtettünk, hogy a vas film növesztésének kísérleti körülményei dominálják a mágneses átfordulási vastagságot [22,23].

2. Komoly az érdeklődés a szendvics szerkezetek transzport tulajdonságai iránt, melynek okát leginkább a gigantikus mágneses ellenállás (GMR) gyakorlati alkalmazásában kereshetjük. A mágneses szendvics szerkezetek állhatnak két különböző mágneses fém rétegből, amelyeket egy nem mágneses távtartó réteg választ el egymástól, de a két mágneses réteg szerepét betöltheti egy domén fal két oldala is. A Kubo-Greenwood formalizmus alapján intenzíven tanulmányoztuk a mágneses vékonyrétegek elektromos vezetési tulajdonságait. Megmutattuk, hogy ab-initio számításokkal lehetséges vizsgálni realisztikus spin-szelep rendszerek óriás mágneses ellenállását (GMR) [2]. Foglalkoztunk a mágneses vékonyrétegek közötti kicserélődési kölcsönhatás és a GMR kapcsolatával [2,10], valamint kifejlesztettünk egy, a véges atomcsoportok mágneses transzportjának számítására alkalmas programot [8]. Az fcc szerkezetű permalloy ötvözetek anizotróp mágneses ellenállására (AMR) kiváló egyezést kaptunk a kísérletekkel [12].

A $\text{Fe}/\text{Si}/\text{Fe}$ hármasrétegben vizsgáltuk a vas rétegek közötti kicserélődési csatolást.

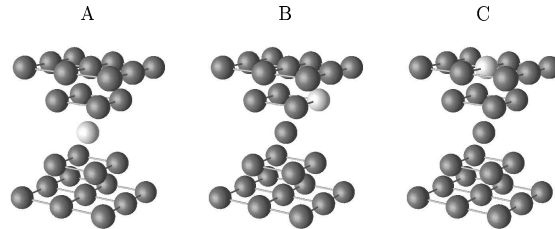
Ideális határfelületek esetén oszcilláló ferromágneses ill. antiferromágneses csatolást kaptunk. A határfelületek közötti keveredést (interdiffúzió) megengedve a csatolás antiferromágneses jellegű lett a Si réteg vastagságának széles tartományában, mely összhangban van a kísérleti megfigyeléssel. Ugyancsak egyezésben a kísérletekkel, az Fe és Si közötti keveredés az óriás mágneses ellenállás drasztikus csökkenéséhez vezetett [7]. Megvizsgáltuk, hogy miként változnak meg a rendszer transzport tulajdonságai, ha a Si távtartó réteget Cr-ra cseréljük [16]. Számításaink megerősítették azt a tapasztalati tényt, hogy néhány % Mn szennyezőjelenléte a Cr réteg spin sűrűség hullám alapállapotát antiferromágneses szerkezetté alakítja. Fontos megjegyezni, hogy ezen rendszer mágneses ellenállására nem csak a határ felületeknek van hatása, mint a félvezető távtartó réteg esetén, hanem a közbülső rétegből magából is jelentős járulék származik.

Tanulmányoztuk a $\text{Ni}_{85}\text{Fe}_{15}$ permalloy ötvözet doménfalainak tulajdonságait. Ab initio számításaink azt mutatták, hogy a két 90° -os ill. egy 180° -os doménfal képződési energiája közötti különbség a falak vastagságának növelése esetén gyorsan csökken, ezért a realisztikus mérettartományban (~ 10 nm) egy 180° -os doménfal könnyen disszociálhat két 90° -os doménfalra. Vezetőképesség számítások arra az eredményre vezettek, hogy a doménfal ellenállás járulékának anizotrópiája a falra merőleges áram esetén zérus, míg a fallal párhuzamos áram esetén a 90° -os és 180° -os doménfalra ellentétes előjelű. [11]

3. Az utóbbi évtizedben végbement fejlődés a pásztázó alagút és atomi erő mikroszkópia terén lehetővé tette különféle nanoszerkezetek létrehozását ellenőrzött körülmények között. Nagy erővel folyik ezen rendszerek kísérleti és elméleti kutatása ígéretesnek mutakozó szerepük miatt a nagysűrűségű adat tárolásban. A jelen pályázatban is jelentős szerepet kapott a nanostruktúrák mágneses és transzport tulajdonságainak a vizsgálata. Ezek a rendszerek alapvetően más mágneses tulajdonságokkal rendelkeznek, mint a vékonyrétegek ill. bulk anyagok. Mind a Pt szubsztrátra helyezett Co, mind a Cu felület közeli Fe nanodrótóok megnövekedett spin- és pálya-mágneses momentummal rendelkeznek és MA energiájuk is többszöröse a hasonló anyagból képzett vékonyrétegénél [5,6,14]. A felületre helyezett nanolánc erőteljes merőleges anizotrópiát mutattak, ugyanakkor a Fe nanodrótok könnyű mágneses iránya a felülettől mért távolság függvényében oszcilláló viselkedést mutatott.

A valóstérbeli Korringa-Kohn-Rostoker módszerünkkel, melyet a Kubo-Greenwood

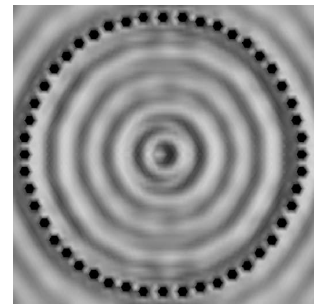
formula alapján véges nanostruktúrák transzportszámítására fejlesztettünk ki [18], különböző geometriájú arany nanokontaktusok vezetőképességét határoztuk meg. Különös figyelmet szenteltünk az átmeneti fém (Pd, Fe és Co) szennyezőknek a kontaktus vezetésére gyakorolt hatásának. Azt találtuk, hogy a vezetés nagyon érzékenyen változik a szennyező atom pozíciójának függvényében. Ezt a változást korrelálni tudtuk a kontaktus centrumában lévő atom rezonás viselkedést mutató s-típusú állapotsűrűségével, melyet a mágneses szennyező kisebbbségi spin d -sávjával való kölcsönhatás indukál [19].



A számolás során használt arany kontaktus modellje. A világos gömb az átmeneti fém szennyezőt jelöli.

Első elveken alapuló adiabatikus spin-dinamika módszert alkalmaztunk fémes felületekre helyezett mágneses "drótok" alapállapotának tanulmányozására. Először azt demonstráltuk, hogy a felületi szimmetria csökkenése a felület normálisához képest dőlt mágneses irányú alapállapot kialakulásához vezethet. Számításokat végeztünk egy hét Co atomból álló láncra, mely a Pt(111) felületen képződő terasz lépcsőjének mentén helyezkedik el. Az általunk kapott alapállapot mágnesezettségi irány, mely kb. 42° -ot zár be a felület normálisával, szinte tökéletes egyezést mutat a korábban végzett kísérlettel [15,13].

Fém felületre helyezett atomok segítségével a hordozó vegyérték elektronjainak interferenciáját hozhatjuk létre, amelyet pásztázó alagút mikroszkóppal láthatóvá is tehetünk. Ezeknek az $u.n.$ kvantum karámnak (quantum corral) az elektronikus és mágneses tulajdonságait vizsgáltuk a beágyazott SKKR módszer felhasználásával [24]. Réz (111) felületére 52 Fe atomot helyeztünk el egy kör kerülete mentén.



Az ab-initio számolás eredményeit egy egyszerű köralakú potenciálgödör modell segítségével értelmeztük. Az ábrán a hordozó elektron állapotainak térbeli eloszlását látjuk a Fermi szint környékén.

3 Publikációs tevékenység, nemzetközi kapcsolatok

A pályázat során 26 tudományos közlemény született, amelyek összesített impakt faktora 68. A megjelent publikációkra már eddig is 70-szer hivatkoztak.

A közlemények jelentős része nemzetközi együttműködés keretein belül született. Kapcsolatunk a Bécsi Műszaki Egyetem Center for Computational Material Science (CMS) csoportjával már több mint egy évtizedes múltra tekinthet vissza. A Peter Weinberger vezette kooperációt a nemzetközi szakma is elismeri, hiszen 2004-ben beválasztottak bennünket a Descartes díj nyolc fős döntősei közé (<http://ec.europa.eu/research/press/2004/pr2307en.cfm>).

A pályázat során elnyert támogatást igyekeztünk arra is felhasználni, hogy több fiatal bevonjunk a kutatásba. Lazarovits Bence és Palotás Krisztián a BME-n szereztek mérnökfizikus diplomát majd a CMS doktori iskolájában folytatták tanulmányaikat és védtek meg PhD fokozatukat. Több publikációban is szerepelnek társszerzőként. Jelenleg az MTA Szilárdtest Kutatóintézetének illetve az University of Liverpool fiatal kutatói. Buruzs Ádám és Antal András 2005-ben kezdték meg posztgraduális tanulmányaikat a CMS és a BME doktori iskolájában a pályázat résztvevői, Szunyogh László és Udvardi László vezetésével. Kutatási témájuk szervesen kapcsolódik a projekt célkitűzéseire.